

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

доктора физико-математических наук Зайцева Дмитрия Кирилловича

на диссертационную работу Титарева Владимира Александровича «Численное моделирование пространственных течений разреженного газа с использованием суперЭВМ», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность работы. Диссертационная работа В.А.Титарева посвящена развитию методов математического моделирования течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана с приближенным интегралом столкновений.

В настоящее время наиболее популярным методом численного моделирования течений разреженного газа является метод прямого статистического моделирования (или метод Монте-Карло), который предполагает расчет движения большого числа молекул с учетом их вероятного взаимодействия друг с другом и с ограничивающими поток поверхностями. Однако, несмотря на ряд очевидных достоинств, этот метод обладает существенными недостатками, главными из которых являются медленная сходимость к статистически независимому решению и необходимость решения нестационарной задачи даже при рассмотрении стационарного (в среднем) течения.

Методы, основанные на численном решении кинетического уравнения Больцмана для функции распределения молекул по скоростям, свободны от указанных недостатков. Однако, ввиду сложности и высокой ресурсоемкости решения шестимерного нелинейного интегро-дифференциального уравнения, каковым является уравнение Больцмана, до недавнего времени этот подход применялся, главным образом, для решения отдельных модельных задач с простой двумерной геометрией. В свою очередь, ограниченный опыт решения практических задач механики разреженного газа на основе кинетического уравнения сдерживает разработку необходимых для этого эффективных численных методов. Также недостаточно изучен вопрос о границах применимости приближенных моделей, используемых для расчета интеграла столкновений.

С учетом сказанного, не вызывает сомнения актуальность диссертации В.А.Титарева, в которой, среди прочего, разработан (и реализован в комплексе

параллельных программ для суперЭВМ) новый эффективный численный метод решения кинетического уравнения на произвольных неструктурированных сетках, проведена валидация результатов решения уравнения Больцмана с модельными интегралами столкновений, продемонстрирована возможность получать за приемлемое для практических приложений время численное решение сложных пространственных задач механики разреженного газа.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Общий объем диссертации составляет 257 страниц, включая 34 таблицы, 104 рисунка и список литературы из 225 наименований.

Во введении обосновывается актуальность диссертационной работы, формулируются ее цели и задачи, а также основные новые научные результаты работы и положения, выносимые на защиту. Приводится внушительный список российских и международных конференций, на которых были представлены результаты работы, перечислены публикации по теме диссертации с указанием личного вклада автора.

В первой главе описана развиваемая в работе общая методология моделирования течений разреженных газов на основе решения кинетических уравнений с приближенным интегралом столкновений. Представлена исходная формулировка уравнений Больцмана с точным интегралом столкновений, рассмотрены варианты построения приближенного интеграла столкновений, описаны используемые начальные и граничные условия для функции распределения молекул по скоростям. Также приводятся линеаризованные формулировки для задач с малыми отклонениями функции распределения от равновесной (максвелловской).

Вторая глава посвящена описанию разработанного численного метода решения кинетического уравнения с приближенным интегралом столкновений. Главными особенностями данного метода, которые, в совокупности, выгодно отличают его от описанных в литературе схем решения уравнения Больцмана, являются: использование как блочно-структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо в физическом и скоростном пространствах; квази-монотонная аппроксимация оператора переноса по методу конечного объема на основе схемы Годунова; консервативность по интегралу столкновений; экономичный неявный алгоритм продвижения по времени установления. Важной частью численного метода является экономичный алгоритм реализации граничного условия зеркального отражения при использовании скоростной сетки, построенной с учетом условий симметрии.

Данные особенности численного метода позволили автору создать на его основе эффективный параллельный программный комплекс, применимый для решения сложных прикладных задач механики разреженного газа в условиях реальной трехмерной геометрии, в том числе при больших числах Маха и сильных перепадах давления и плотности газа.

В третьей главе диссертации приводится описание созданных автором программных комплексов «Несветай-2Д» и «Несветай-3Д». При этом, поскольку двумерный пакет «Несветай-2Д» является, по сути, упрощенным предшественником своего трехмерного «тезки», основное внимание уделяется более универсальному трехмерному пакету «Несветай-3Д».

По своей структуре, программный комплекс «Несветай-3Д» включает:

- вычислительное ядро (базовая библиотека), модули которого, помимо операций ввода-вывода и построения информации о связности сетки, реализуют алгоритмы реконструкции скалярных функций для аппроксимации оператора переноса;

- кинетический решатель, который является надстройкой над ядром и реализует схему решения кинетического уравнения на неструктурированной сетке в шестимерном фазовом пространстве;

- препроцессор, который обеспечивает декомпозицию пространственной и скоростной расчетной сетки для проведения параллельных вычислений.

Организация параллельных вычислений в пакете «Несветай-3Д» выполнена в рамках довольно распространенной двухуровневой модели OpenMP + MPI: технология MPI используется для обмена данными между узлами суперЭВМ, тогда как внутри каждого узла с общей памятью организуется параллельная работа OpenMP нитей. Из интересных особенностей параллельной реализации, нацеленных на более эффективное использование ресурсов суперкомпьютера, можно отметить, что на верхнем (MPI) уровне распараллеливания предусмотрены два варианта декомпозиции 6-мерной расчетной сетки – в скоростном или в физическом пространстве, а на нижнем (OpenMP) уровне, помимо обычных OMP-циклов, используется разбиение сетки на блоки в физическом пространстве для более эффективной работы метода решения системы уравнений для приращений функции распределения.

Параллельная версия комплекса протестирована на нескольких мощных суперкомпьютерах с использованием шестимерных расчетных сеток с общим числом узлов до двадцати миллиардов. Сравнивая два варианта декомпозиции сетки автор приходит к выводу, что MPI-разбиение по пространству не имеет ограничений на размер задачи и более универсально, однако MPI-разбиение по

скорости проще и, при использовании двухуровневого OpenMP + MPI подхода, масштабируется практически также хорошо.

В четвертой, самой обширной главе работы представлены результаты многочисленных расчетов течения разреженного газа через микроканалы различной конфигурации (длинные, короткие, цилиндрические, конические, ступенчатые) в широком диапазоне чисел Кнудсена и перепадов давления.

Применительно к специальности диссертации, пожалуй, наиболее значимыми являются результаты расчетов, направленных на валидацию математической модели и тестирование численного метода. В частности, для канонической тестовой задачи истечения газа в вакуум через короткую круглую трубу показано хорошее согласие результатов автора, полученных на основе модели с приближенным интегралом столкновений, с эталонными расчетами по методу прямого статистического моделирования, а также с решением точного уравнения Больцмана и с экспериментальными данными. Для труб умеренной длины показано хорошее согласие результатов с имеющимися расчетами по методу прямого статистического моделирования. Для длинных труб проведено сравнение с аналитическим решением Пуайзеля для несжимаемой жидкости и с приближенным методом плоских сечений; установлены границы применимости данных подходов для течения разреженного газа.

По результатам тестирования численного метода показано, в частности, что при использовании гексаэдральной сетки TVD схема с локально-одномерной реконструкцией вдоль сеточной линии предпочтительнее схемы с трехмерной реконструкцией по методу наименьших квадратов. Получен близкий ко второму порядку сходимости по сетке для основной расчетной величины – массового расхода. Продемонстрирована эффективность параллельной реализации численного метода и важность использования неявной схемы для быстрой сходимости процесса установления.

Заслуживает внимания вывод автора о том, что, в задаче об истечении газа в вакуум через цилиндрический канал, существенное влияние на расход оказывает течение во входном резервуаре, причем это влияние усиливается по мере уменьшения числа Кнудсена. Также весьма интересен результат, касающийся образования в канале с внезапным расширением характерной бочкообразной структуры с замыкающим диском Маха.

Заключительная, пятая глава диссертации посвящена применению разработанного программного комплекса «Несветай-3Д» для решения задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа. Для снижения вычислительных затрат автором предложен метод построения

неравномерной неструктурированной сетки в пространстве скоростей с учетом априорных оценок необходимого локального сгущения.

На модельной задаче гиперзвукового обтекания круглого цилиндра проведена оценка влияния скоростной сетки на точность численного решения, в первую очередь на расчет наиболее чувствительной величины – потока энергии на поверхность. При значениях числа маха набегающего потока $M_\infty=10$ и 25 выполнено сопоставление с данными прямого статистического моделирования в широком диапазоне чисел Кнудсена. Впервые показана приемлемая точность S-модельного кинетического уравнения Шахова в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, тогда как использование более простой модели БГК приводит к заметной ошибке, особенно в профиле температуры и коэффициенте теплоотдачи.

Наконец, заключительная серия расчетов относится к гиперзвуковому обтеканию двух реалистичных моделей спускаемых космических аппаратов – воздушно-космического аппарата ЦАГИ и затупленного сегментально-конического тела с надстройками – в условиях, типичных для высоты полета 90 и 100 км. Где это было возможно, проведено сравнение с результатами прямого статистического моделирования и еще раз подтверждена приемлемая точность расчетов на основе S-модельного кинетического уравнения Шахова. Продемонстрирована хорошая масштабируемость разработанного комплекса «Несветай-3Д» на современных суперкомпьютерах при использовании до 256 узлов, содержащих процессоры Intel Xeon Phi (240 гиперпоток) или по два «обычных» 14-ядерных процессора, на сетках с числом узлов почти 20 миллиардов. Впервые показана принципиальная возможность моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа вокруг спускаемых аппаратов на основе численного решения кинетического уравнения за приемлемое время.

В качестве наиболее значимых результатов диссертационной работы, определяющих ее **научную новизну**, можно выделить следующие:

– Разработан оригинальный численный метод решения кинетического уравнения Больцмана с приближенным интегралом столкновений в областях сложной геометрии; главными отличительными особенностями метода являются: а) ориентация на использование произвольных неструктурированных сеток как в физическом, так и в скоростном пространствах; б) консервативность численной схемы как по оператору переноса, так и по интегралу столкновений; в) экономичный неявный алгоритм продвижения по времени установления.

– Предложенный численный метод реализован в новом прикладном комплексе параллельных программ «Несветай» для современных суперЭВМ,

который показал работоспособность и хорошую масштабируемость при использовании до 256 узлов кластера на шестимерных сетках с общим числом узлов до 20 миллиардов.

– Впервые проведена валидация метода моделирования сложных пространственных течений разреженного газа на основе численного решения кинетических уравнений с приближенными интегралами столкновений применительно к задачам гиперзвукового обтекания затупленных тел и течения газа в микроканалах.

– Выполнены систематические расчеты течения разреженного газа через микроканалы различной конфигурации в широком диапазоне геометрических и режимных параметров. Показано хорошее согласие результатов с имеющимися в литературе экспериментальными и расчетными данными; уточнены границы применимости существующих приближенных методик.

– Впервые продемонстрирована возможность получать за приемлемое для практических приложений время численное решение кинетического уравнения для задачи гиперзвукового обтекания реалистичной модели спускаемого космического аппарата для условий входа в атмосферу Земли с первой космической скоростью.

Достоверность представленных в диссертации результатов численного моделирования и основанных на них выводов обусловлена тем, что:

– разработанный комплекс программ верифицирован на ряде тестовых задач путем сопоставления результатов расчета с данными измерений и с эталонными расчетами других авторов;

– параллельная эффективность комплекса проверена на нескольких современных кластерах с различной архитектурой;

– вычислительные эксперименты автора сопровождаются грамотной методической проработкой (анализ сеточной зависимости решения, обоснованный выбор размеров расчетной области и т.п.).

На этом основании можно констатировать, что сформулированные в диссертации выводы и рекомендации приводятся вполне **обоснованно**.

Предложенные оригинальные подходы по реализации вычислительных алгоритмов и полученные с помощью комплекса программ «Несветай» данные о структуре и свойствах сложных течений разреженного газа несомненно являются **новыми научными результатами**.

Результаты работы достаточно полно опубликованы в рецензируемых научных изданиях и представлены на профильных Российских и международных конференциях. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Замечания по работе сводятся к следующему:

1) В диссертации не приводятся данные о сравнительной вычислительной эффективности популярного метода прямого статистического моделирования течений разреженного газа и развимаемого автором метода на основе решения приближенного кинетического уравнения. Было бы крайне интересно, в частности, сравнить время расчета гиперзвукового обтекания спускаемого аппарата с помощью разработанного комплекса «Несветай» и известного комплекса SMILE.

2) Расчеты течения газа через микроканалы конечной длины выполнены в полной трехмерной постановке без учета очевидных условий симметрии, что увеличило вычислительные затраты, как минимум, в четыре раза (при том, что время расчета одного варианта на мощнейшем кластере России доходило до 14 дней). Из текста диссертации неясно, чем обусловлена такая расточительность.

3) При решении задачи об истечении газа в вакуум в упрощенной постановке без расчета течения во входном резервуаре, автор задает на входе в канал условие «испарения», которое не учитывает наличия средней скорости направленного движения молекул. Принимая во внимание, что для некоторых рассмотренных вариантов скорость направленного движения газа сопоставима с тепловой скоростью молекул (например, на рисунке 4.47 число Маха на входе в канал более 0.4), такое приближение представляется неоправданно грубым. Возможно, именно это явилось одной из причин отмеченной автором большой погрешности такого упрощенного расчета при малых числах Кнудсена.

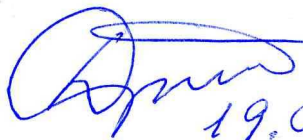
Высказанные замечания не снижают высокой оценки работы в целом и ни в коей мере не ставят под сомнение достоверность, обоснованность и новизну представленных в диссертации результатов и основанных на них выводов и рекомендаций.

В качестве **общего заключения** можно отметить, что диссертация В. А. Титарева представляет собой научно-квалификационную работу, обладающую несомненным внутренним единством, которое определяется решением ряда родственных задач математического моделирования механики разреженных газов с применением разработанных автором численных методов и алгоритмов, реализованных в современном комплексе параллельных программ. Выбранный объект исследования, использованные методы и полученные результаты в полной мере отвечают уровню докторской диссертационной работы, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения и изложены научно обоснованные математические, алгоритмические и программные решения, совокупность которых можно

квалифицировать как крупное научное достижение в области разработки методов и средств математического моделирования механики разреженных газов.

На основании сказанного, считаю, что рецензируемая работа полностью отвечает требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям согласно п.9 действующего Положения о порядке присуждения ученых степеней, и другим критериям, установленным в разделе II этого Положения. Автор диссертации, Титарев Владимир Александрович, достоин присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент
д. ф-м. н.

 Д. К. Зайцев
19.03.2012

Зайцев Дмитрий Кириллович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен» ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»
Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
т. 8-812-2972419, zaitsev-aero@yandex.ru, <http://aero.spbstu.ru>.

